問9.1

$$S_y^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i - \mathbf{w}^T \bar{\mathbf{x}})^2$$

$$= \mathbf{w}^T \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T \mathbf{w}$$

$$= \mathbf{w}^T S \mathbf{w} \quad \left(S := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T \right)$$

問9.2

第i主成分の分散は固有値固有ベクトルの関係から、

$S_{y_i}^2 = \mathbf{w}_i^T S \mathbf{w}_i = \mathbf{w}_i^T \lambda_i \mathbf{w}_i = \lambda_i$ が成立する。

そこでSの固有値（$\det|S - \lambda I_p| = 0$ のp個の解）を

$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$ として、各固有値の固有ベクトルを

$\mathbf{w}_1 = (w_{11}, w_{12}, \cdots, w_{1p})^T$, $\mathbf{w}_2 = (w_{21}, w_{22}, \cdots, w_{2p})^T$,

$\cdots$, $\mathbf{w}_p = (w_{p1}, w_{p2}, \cdots, w_{pp})^T$ とおく。なお $\mathbf{w}_i \mathbf{w}_j = \delta_{ij}$.

いま $W = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \cdots, \mathbf{w}_p)$, $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p)$ とすると、
p個の固有方程式はベクトル表記すると (i) $SW = W\Lambda$ になり、
右から W^T をかけて、(iii) $S = W \Lambda W^T$ を得る。

$$S = W\Lambda W^T = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \cdots, \mathbf{w}_p)\begin{pmatrix} \lambda_1 & & O \\ & \lambda_2 \ddots & \\ O & & \lambda_p \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^T \\ \mathbf{w}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{w}_p^T \end{pmatrix}$$

$$= \lambda_1 \mathbf{w}_1 \mathbf{w}_1^T + \lambda_2 \mathbf{w}_2 \mathbf{w}_2^T + \cdots + \lambda_p \mathbf{w}_p \mathbf{w}_p^T$$

だから、
$$\mathrm{tr}\, S = \mathrm{tr}\begin{pmatrix} \lambda_1 w_{11} w_{11} + \lambda_2 w_{21} w_{21} + \cdots + \lambda_p w_{p1} w_{p1} & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_1 w_{1p} w_{1p} + \lambda_2 w_{2p} w_{2p} + \cdots + \lambda_p w_{pp} w_{pp} \end{pmatrix}$$

$$= \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_p = \mathrm{tr}\,\Lambda$$

問9.3

$$r_{y_i, x_j} = \frac{\mathrm{Cov}(y_i, x_j)}{\sqrt{\mathrm{Var}(y_i)}\sqrt{\mathrm{Var}(x_j)}} = \frac{\lambda_i w_{ij}}{\sqrt{\lambda_i}\ \sqrt{s_{jj}}} = \frac{\sqrt{\lambda_i}\ w_{ij}}{\sqrt{s_{jj}}}$$

$$\left[\begin{aligned}
\mathrm{Cov}(y_i, x_j) &= \frac{1}{n}\left(w_i^T x - w_i^T \bar{x}\right)^T (x - \bar{x}) \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}^T \\
&= \lambda_i\ w_i \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \lambda_i w_{ij}
\end{aligned}\right]$$

j番目だけ1
それ以外0

問9.4

(1) $X = VLW^T = (v_1, v_2, \cdots, v_q) \begin{pmatrix} l_1 & & & \\ & l_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & l_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1^T \\ w_2^T \\ \vdots \\ w_q^T \end{pmatrix}$ ——①

と特異値分解できたとき、$\lambda_j = l_j / n$ であり、

第j主成分の分散が λ_j であることと、データ $x_i - \bar{x}$ の第j主成分スコアは $(x_i - \bar{x})^T w_j$ で与えられることからわかる。

(2) ①より $X = VLW^T$ だから

$$X = \lambda_1 v_1 w_1^T + \cdots + \lambda_m v_m w_m^T + \cdots + \lambda_q v_q w_q^T \quad (m \leq q)$$

$$\simeq \lambda_1 v_1 w_1^T + \cdots + \lambda_m v_m w_m^T \quad (\text{第m主成分まで用いた})$$

$$= \sqrt{l_1} \frac{X}{\sqrt{l_1}} w_1 w_1^T + \cdots + \sqrt{l_m} \frac{X}{\sqrt{l_m}} w_m w_m^T$$

$$= X w_1 w_1^T + \cdots + X w_m w_m^T$$

第i行を比べると、

$$x_i - \bar{x} \simeq x_i^{(m)} - \bar{x} = \sum_{k=1}^{m} \left\{(x_i - \bar{x})^T w_k\right\} w_k$$

$$\therefore\ x_i \approx x_i^{(m)} = \bar{x} + \sum_{k=1}^{m} \left\{(x_i - \bar{x})^T w_k\right\} w_k$$

問9.5

非線形関数によって入力空間のデータ $x_1, x_2, \cdots, x_n$ を高次の

特徴空間へ写像：$\Phi(x) = (\phi_1(x), \phi_2(x), \cdots, \phi_r(x))^T$ を用いて

$$(x_1, x_2, \cdots, x_n)^T \longmapsto (\Phi(x_1), \Phi(x_2), \cdots, \Phi(x_n))^T$$

データの中心化を行う：$Z_c = (\Phi_c(x_1), \Phi_c(x_2), \cdots, \Phi_c(x_n))^T$

標本分散共分散行列 $S_c = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \Phi_c(x_i)\Phi_c(x_i)^T = \frac{1}{n} Z_c^T Z_c$

固有値問題：$S_c w_\alpha^F = \lambda_\alpha^F w_\alpha^F$ は $w_\alpha^F = Z_c^T c_\alpha^F$ より

$$\frac{1}{n} Z_c^T Z_c Z_c^T c_\alpha^F = \lambda_\alpha^F Z_c^T c_\alpha^F$$

$$Z_c Z_c^T Z_c Z_c^T c_\alpha^F = n\lambda_\alpha^F Z_c Z_c^T c_\alpha^F$$

$$\therefore K_c c_\alpha^F = n\lambda_\alpha^F c_\alpha^F \quad (K = Z_c Z_c^T)$$

に帰着する。c_α^F を解けば $w_\alpha^F = Z_c^T c_\alpha^F = \sum_{i=1}^{n} c_{i\alpha}^F \Phi_c(x_i)$

と分かるので、才 α 番目の主成分 y_α^F は

$$y_\alpha^F = (w_\alpha^F)^T \Phi_c(x) = \sum_{i=1}^{n} c_{i\alpha}^F \underline{\Phi_c(x_i)^T \Phi_c(x)}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} c_{i\alpha}^F \underline{K_c(x_i, x)}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} c_{i\alpha}^F x_i^T x$$

これは変数の線形結合に基づく主成分である。

問 9.8

(1) $Z_c = \begin{pmatrix} \Phi_c(x_1)^T \\ \Phi_c(x_2)^T \\ \vdots \\ \Phi_c(x_n)^T \end{pmatrix} \overset{中心化}{=} \begin{pmatrix} \Phi(x_1)^T \\ \Phi(x_2)^T \\ \vdots \\ \Phi(x_n)^T \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \bar{\Phi}^T \\ \bar{\Phi}^T \\ \vdots \\ \bar{\Phi}^T \end{pmatrix}$

$$= \underset{\underset{\mathbb{R}^{n\times r}}{\cap}}{Z} - \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \bar{\Phi}^T = Z - \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{n}(1, 1, \cdots, 1) \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_n \end{pmatrix}$$

$$= Z - \frac{1}{n} \mathbb{1}_n \mathbb{1}_n^T Z.$$

(2) $K_c = Z_c Z_c^T = \left(Z - \frac{1}{n}\mathbb{1}_n \mathbb{1}_n^T Z\right)\left(Z - \frac{1}{n}\mathbb{1}_n \mathbb{1}_n^T Z\right)^T$

$$= \left(I_n - \frac{1}{n}\mathbb{1}_n \mathbb{1}_n^T\right) Z Z^T \left(I_n - \frac{1}{n}\mathbb{1}_n \mathbb{1}_n^T\right)^T$$

$$= \left(I_n - \frac{1}{n}\mathbb{1}_n \mathbb{1}_n^T\right) K \left(I_n - \frac{1}{n}\mathbb{1}_n \mathbb{1}_n^T\right)^T.$$